Symmetric Anderson Lattice Model の基底状態

静岡大工短大　山田耕作
東大物性研　芳田　奎

周期的 Anderson-Hamiltonian の基底状態について、完全に電子―空孔対称のある場合に限って、1個のd電子に対する symmetric Anderson 模型と対比しながら問題を整理して報告する.

§1.　周期的 Anderson model の Hamiltonian は

$$H = \sum_{k\sigma} \varepsilon_k c_{k\sigma}^{+} c_{k\sigma} + \sum_{i,\sigma} E_d a_{i\sigma}^{+} a_{i\sigma}$$
$$+ V \sum_{k\sigma} (c_{k\sigma}^{+} a_{k\sigma} + a_{k\sigma}^{+} c_{k\sigma})$$
$$+ \frac{1}{2} U \sum_{i\sigma} n_{di\sigma} n_{di-\sigma} \qquad (1)$$

によって記述される. ε_k は伝導電子のエネルギー準位, E_d は局在 d 電子のエネルギー準位, U は d 電子間のクーロン斥力, V は s-d 間の遷移マトリックス要素である. この Hamiltonian の対称の条件は次の3つの関係式によって与えられる.

(1)　$\varepsilon_{k+Q} = -\varepsilon_k$,

(2)　$E_d = -\frac{U}{2}$,

(3)　$N_e/N = 2$

N_e は電子数, N は原子数である. この条件が満たされている場合 $U=0$ のとき, s-d 混成バンドは丁度半分電子によって占められており, Fermi 面には混成によってエネルギー gap が発生し電子系は絶縁体になる.

このような状態に, d 電子間のクーロン斥力を導入したとき基底状態はどのように変化するかを調べるのが我々の

目的である。

§2. Hartree-Fock 近似では U の小さい間は出発点と同じく非磁性状態にあるが、U がある値を越えると格子が2つの部分格子に分かれ反強磁性状態に転移する。この転移は

$$\chi_G(0)\, U = 1 \qquad (2)$$

によって与えられる。ここに $\chi_G(0)$ は d 電子だけに磁場が働いた場合の d 電子の staggered 帯磁率で

$$\chi_G(0) = \frac{\rho_0}{2V^2}\left[(D^2+4V^2) - 2V^2 \log\frac{\sqrt{D^2+4V^2}+D}{2V}\right] \qquad (3)$$

によって与えられる。ここに ρ_0 は伝導電子の状態密度、$\pm D$ はバンドの上限と下限である。

U が (2) の条件を越えて大きくなると反強磁性状態に変るが、反強磁性状態での電子のエネルギーバンドは分裂し4つのバンドが形成される。このうち下から2つのバンドが電子によって占拠されるが、上のバンドの top ははじめ $k=0$ の点にあるが $U\{\langle n_{d\uparrow}\rangle - \frac{1}{2}\}$ が $V/\sqrt{2}$ を越すと top は $k=\frac{G}{2}$ に移る。この事情は次に述べる U についての摂動計算の結果と類似している。

§3. 次に $U=0$ を出発点にして U についての摂動計算によって基底状態を調べる。計算はいわゆる Fermi 液体論による展開による。対称性が満たされる場合には無摂動 d 電子の Green 関数は

$$g^0_{k+G}(\omega) = -g^0_k(-\omega) \qquad (4)$$

の対称性をもつ。このため、自由エネルギー F, d-電子の自己エネルギー $\Sigma_k(\omega)$、χ_{AF} が U の偶関数のみで

のみで展開され、$\chi_{\uparrow\downarrow}$ は U の奇関数のみで展開されることになる。この事情は d電子1個の場合と全く平行して論じることができる。Uが大きくなると d電子の電荷揺動が減少するであろうから $\chi_{\uparrow\uparrow}$ と $\chi_{\uparrow\downarrow}$ は互いに近づく。しかし周期的 Anderson 模型の場合は d電子1個の場合ほど一般論から出せる結論はそう多くは期待できないであろう。

そこで、具体的計算を行う必要がある。我々は今迄には d電子の自己エネルギーに着眼し $\Sigma_k(\omega)$ の U について2次の項を計算し、これを用いて d電子の状態密度を計算した。$\Sigma_k(\omega)$ は U によって k-依存性、ω-依存性をもつ。このため d電子のエネルギー準位は

$$E_k^{\pm}(\omega) = \frac{1}{2}\left[\varepsilon_k + \Sigma_k(\omega) \pm \sqrt{(\varepsilon_k - \Sigma_k(\omega))^2 + 4V^2}\right], \quad (5)$$

のように $\Sigma_k(\omega)$ を通じて U と共に変動してゆく。

$E_k^+(\omega)$ ははじめ U の小さい所では $k=0$ の点に極小値をもつが U が大きくなると $k=0$ は極大に変わり、極小値をとる点は $\frac{\pi}{2}$ の方に移動する。この事情は Hartree-Fock の場合の E_k^+ の振舞いと著しく異なっている。

また、$\Sigma_k(\omega)$ は一般に

$$\Sigma_k(\omega + i\delta) \sim \frac{1}{4}\frac{U^2}{\omega + i\delta}, \quad \omega \gg |V| \quad (6)$$

のような振舞いをする。これに対応して d電子の状態密度に $\omega \simeq \frac{U}{2}$ の近くで peak が現れる。この事情は ω の小さい所の構造は別にして、1つの d軌道の場合(近藤効果)と全く同様である。以上の $\Sigma_k(\omega)$ と状態密度の特性は1次元の場合だけでなく2次元、3次元の場合にも共通に現れる

以上のような特性の源は $\Sigma_k(0)$ が1次元の場合には $k=\frac{\pi}{2}$ で、2次元・3次元の場合にはバンドの中央 $\varepsilon_k=0$ の面上で消えるという事実にある。このことは2次元、3次元に対しても $\Sigma_k(\omega)$ の満足する対称性

$$\Sigma_{k+G}(\omega) = -\Sigma_k(-\omega) \qquad (7)$$

を根拠に一般的に証明することができる。ただし、3次元 sc-lattice においては half-filled ($\varepsilon_k=0$) の Fermi 面が曲面になっているせいか、その上の $k_x+k_y=\pi$, $k_z=\frac{\pi}{2}$ 及びこれと同等の24本の線上では(7)を用いる対称性の議論のみで $\Sigma_k(0)=0$ が導けるが、他の面上の点に対しては $\Sigma_k^{(2)}(\omega)$ の数値計算の結果に依る。(3次元 bcc-lattice の場合は $\varepsilon_k=0$ の面が平面であるので対称性の議論だけで $\Sigma_k(0)=0$ が導き出せる)

従って2次元、3次元でも一般にUが大きい場合 filled band のエネルギーの最大値は $\varepsilon_k=0$ の面の近くにあり、そこに gap が存在する。この gap は U を大きくにつれ最後迄存続する。以上が我々の得た最も重要な結論である。

なお、一般に gap の位置、大きさの変動を見るために、$\Sigma_k(\omega)=\alpha\omega+\beta(k-\frac{\pi}{2})$, $\alpha<0$, $\beta<0$ 及び $\varepsilon_k=\gamma(k-\frac{\pi}{2})$ のように ω, k の1次式と仮定し、gap の位置、大きさを求めた。gap の大きさは explicit に γ に比例し、その位置は α, β, γ に depend して変わる。

§4. さて、以上のような Fermi 液体的非金属状態は U の大きい所迄安定に存在しうるかという問題が残る。Hartree-Fock 近似では(2)の条件が反強磁性の長距離秩序の出現条件である。しかし、このような所では現実には正常状態の instability は期待できない。実際には staggered 帯磁率

のU^2の項を計算すれば このことを示すことが出来るであろう。定性的には、Hartree-Fockのinstabilityが起ってバンドに新しくgapが生じるのは1原子当り1個の電子がつまった所であって、$N_e/N=2$の場合にはFermi面にはすでにgapが存在していて新しく生じたgapのために特にエネルギーが安定化されることはないこと。また反強磁性状態での一電子エネルギーの分散関係が$\Sigma_a(\omega)$を考えた場合の分散関係と非常に似ていることから電子相関を考慮すればFermi液体的状態が十分stabilizeされることが予想される。そして場合によってはUの大きい極限迄non-magnetic状態が存続するかも知れない。この辺の事情を明かにするには、もっといろいろの物理量を計算する必要があろう。同時にs-d limitでHartree-Fockで生じた反強磁性状態の安定性を再検討する必要があるであろう。